UNIVERSITE ABDELMALEK ESSAADI
Faculté des Sciences
-Tétouan-

Année 2008/2009
SMP

T.D. de chimie générale I (2ème partie)
Série N° 2

I- Le moment dipolaire de H_2S, sulfure d'hydrogène est 0,95 Debye. L'angle que font les liaisons S-H entre elles vaut 95°.

1) Calculer le moment dipolaire de la liaison S-H dans cette molécule.
2) Calculer le caractère ionique partiel de cette liaison, connaissant la longueur de la liaison S-H qui est égale à 1,3Å .

II- 1) Les moments dipolaires électriques des molécules $BeCl_2$ et BF_3 sont nuls. Quelle est la structure spatiale de chacune de ces molécules?

2) Préciser l'état d'hybridation du béryllium et du bore.

3) Dans le cas de BF_3, donner les expressions des fonctions d'onde des trois orbitales hybrides h_1 , h_2 et h_3 du bore en fonction des orbitales atomiques et des coefficient a_i ,b_i et c_i (i = 1, 2, 3). (On prend la molécule dans le plan xoy).

4) a) Montrer que les coefficients $a_1 = a_2 = a_3 = \sqrt{\frac{1}{3}}$

b) En supposant que l'orbitale h_1 est dirigée suivant l'axe ox, déterminer la valeur du coefficient b_1.

c) Connaissant les coefficients a_1 et b_1 de l'orbitale h_1, déterminer le coefficient b_2 de l'orbitale h_2.

5) Représenter la molécule BF_3 en précisant l'angle que font les liaisons B-F entre elles.

6) Comment peut-on expliquer par le même type d'hybridation du béryllium dans $BeCl_2$, la géométrie de la molécule C_2H_2?

7) Comment peut-on expliquer par le même type d'hybridation du bore dans BF_3, la géométrie de la molécule C_2H_4?

ETUSUP .com

. Charge ionique

caractère ionique

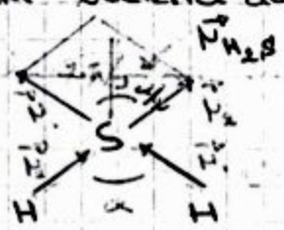
$$\boxed{C.I = \frac{\mu_{exp}}{\mu_i} \times 100}$$

μ = moment dipolaire

Exercice 1 :

1. Soit la molécule H_2S , $\mu_{H_2S} = 0,95\,D$ et $\alpha = 95°$.

. C'est une molécule de plusieurs liaisons sont moment dipolaire est égale à la somme vecteriel des moment dipolaires des liaison qui la constitue.



. $\vec{\mu}_{H_2S} = \vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2$ ... $(\mu_1 = \mu_2 = \mu_{H_2S})$

. $\cos \alpha/2 = \dfrac{1/2\, \mu_{H_2S}}{\mu_{S-H}} \Rightarrow \mu_{S-H} = 1/2 \dfrac{\mu_{H_2S}}{\cos \frac{95}{2}}$.

$$\boxed{\mu_{S-H} = 0,70\,D}$$

2. Le moment ionique (théorique) est calculé en supposons que la liaison est 100% ionique et dans ce cas : δ égale à 1.

$$\boxed{\%\ C.I = \frac{\mu_{exp}}{\mu_i} \times 100}$$

. $\mu_i = 4.8 . l . \delta$.

. $\mu_i = 4.8 \times 1,3 \times 1$.

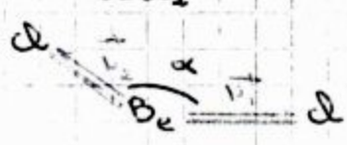
. $\mu_i = 6,24\,D$.

. $\% C.I = \dfrac{0,70}{6.24} \times 100 = \boxed{11,22\% = \%\ C.I_{S-H}}$.

Exercice 2 :

1. Soient les molécules $BeCl_2$ et BF_3 :

. $\mu_{BeCl_2} = 0$ et $\mu_{BF_3} = 0$.



$\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2 = \vec{0}$.

. $\mu_1 = \mu_2 = \mu_{Be-Cl}$

. $\|\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2\|^2 = \|\vec{\mu}_1\|^2 + \|\mu_2\|^2 + 2\,\|\vec{\mu}_1\|\,\|\vec{\mu}_2\| \cdot \cos\alpha$

$\vec{a}$ $\|\vec{a}\| = a$ — $\vec{b}$ $\|\vec{b}\| = b$ | $\|\vec{a} + \vec{b}\|^2 = a^2 + b^2 + 2ab \cos\alpha$

ETUSUP .com

• $\mu_{BeCl} + \mu_{BeCl} + 2\mu_{Be-Cl} \cos\alpha = 0 = \mu_{BeCl_2}$.

• $1 + \cos\alpha = 0 \Rightarrow \cos\alpha = -1$.

• $\alpha = 180$

.. La molécule $BeCl_2$ est formée de deux liaison Be ; Cl chaqune possédent un moment dipolaire. pour que le moment globale de la molécule soit nule Il faut que les deux vecteurs représentent les moment dipolaire des deux liaison, soit opposé l'un a l'autre. La molécule est donc liniaire.

- BF_3 :

• 3 liaisons B-F, $\vec{\mu}$ $\vec{\mu}_1$, $\vec{\mu}_2$, $\vec{\mu}_3$, $\|\vec{\mu}_1\| = \|\vec{\mu}_2\| = \|\vec{\mu}_3\| = \mu_{B-F}$

$\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2 + \vec{\mu}_3 = 0$ $\vec{\mu}_3 = -(\vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2)$

- puis que le moment dipolaire de la molécule BF_3, alors la somme des trois vecteurs réprésentent les trois moment dipolaire des trois liaisons B-F constituent à molécule est nul. donc les trois vecteurs au même plan ce qui signifié que la molécule BF_3 est plane.

$\mu_1 = \mu_2 = \mu_3 = \mu_{BF_3}$

- comme les trois liaisons B-F sont équivalent l'angle entre deux liaison quelconque doient réstés de m̂ et par conséquent Il doit prendre la valeur de 120°.

2 .. liniaire → Sp → $BeCl_2$.

• trigonale → Sp^2 → BF_3.

• tetraedrique → Sp^3 → CH_4.

• Bipyramide à base triangulaire → Sp^3d.

• octaedrique → Sp^3d^2.

3 - l'expression des O.A.H dans le cas de BF_3 prise dans le plan xoy :

• $2p_x$ et $2p_y$ avec 2s vaut hybridées selon Sp^2 pour donner h_1, h_2 et h_3.

ETUSUP .com

$$\left.\begin{array}{l} \cdot\ 2s \\ \cdot\ 2p_x \\ \cdot\ 2p_y \end{array}\right\} \xrightarrow{sp^2} \left\{\begin{array}{l} h_1 = a_1 s + b_1 p_x + c_1 p_y \\ h_2 = a_2 s + b_2 p_x + c_2 p_y \\ h_3 = a_3 s + b_3 p_x + c_3 p_y \end{array}\right.$$

$\cdot\ B\ (Z=5) : 1s^2\ 2s^2\ 2p^1$

$$\cdot\ B^* : 1s^2\ \underbrace{2s^1\ 2p_x^1\ 2p_y^1}_{\xrightarrow{sp^2}}\ 2p_z^0$$

$\cdot\ h_1 \cdot\ h_2 \cdot\ h_3$

4-a:

- <u>en générale:</u>

$\cdot\ h_1 \ldots h_n$

$\cdot\ \int h_i h_j\, dv = 0 \qquad i \neq j$

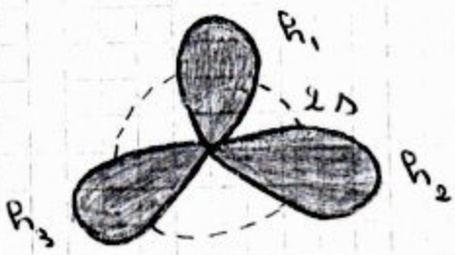
- les O.A.H sont orthogonales deux à deux.

- $\int h_i^2\, dv = 1$, h_i est normalisée.

$\cdot\ \sum_{i=1}^{n} a_i^2 = 1$

$\cdot\ \sum_{i=1}^{n} b_i^2 = 1$

$\vdots$



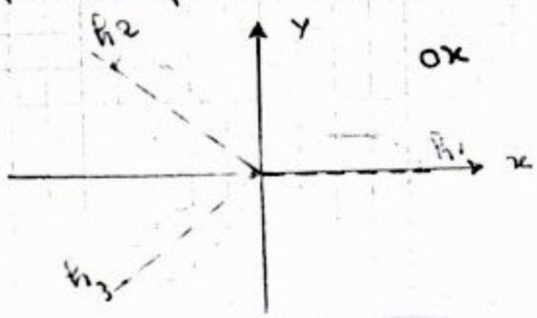
- puisque 2s est sphérique sa contribution sera la même pour les 3 O.A.H h_1 et h_2 et h_3 donc a_1 sera $= a_2$ sera $= a_3$

- $a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 = 1$

$\cdot\ 3a^2 = 1 \qquad \cdot\ a = \sqrt{1/3}$

$\cdot$ Donc: $\boxed{a_1 = a_2 = a_3 = \sqrt{1/3}}$

b- en supposant que l'orbitale h_1 est dirigée suivant ox.



ETUSUP .com

- l'orbital 2s n'a pas d'influence sur l'orientation de h_1, h_2 et h_3 (symétrie sphérique) ce sont les orbitales $2p_x$ et $2p_y$ qui détermine la direction finale des orbitales Hybrides h_1, h_2 et h_3. puisque h_1 est dirigée suivant ox alors la contribution de $2p_y$ dans h_1 est nulle et par conséquent $c_1 = 0$.

$$h_1 = a_1 s + b_1 p_x$$

- h_1 est normalisée.

$$\int h_1^2 dv = 1$$

- $\int h_1^2 dv = 1$
- $\int (a_1 s + b_1 p_x)^2 dv = 1$
- $\int (a_1^2 s^2 + 2a_1 s b_1 p_x + b_1^2 p_x^2) dv = 1$
- $a_1^2 \underbrace{\int s^2 dv}_{1} + 2a_1 b_1 \underbrace{\int s p_x dv}_{0} + b_1^2 \underbrace{\int p_x^2 dv}_{1} = 1$
- $a_1^2 + b_1^2 = 1$
- $b_1^2 = 1 - a_1^2$
- $b_1^2 = 1 - 1/3$
- $b_1^2 = 2/3$
- $\boxed{b_1 = \pm\sqrt{2/3}}$

- donc : $\boxed{b_1 = +\sqrt{2/3}}$ (car h_1 est dirigée selon l'axe ox.)

c- h_1 et h_2 sont orthogonales.

- donc :

$$\int h_1 h_2 dv = 0$$

- $\int (a_1 s + b_1 p_x) \times (a_2 s + b_2 p_x + c_2 p_y) dv = 0$
- $a_1 a_2 \underbrace{\int s^2 dv}_{1} + a_1 b_2 \underbrace{\int s p_x dv}_{0} + a_1 c_2 \underbrace{\int s p_y dv}_{0} + b_1 a_2 \underbrace{\int p_x s dv}_{0}$
  $+ b_1 b_2 \underbrace{\int p_x^2 dv}_{1} + b_1 c_2 \underbrace{\int p_x p_y dv}_{0} = 0$
- $a_1 a_2 + b_1 b_2 = 0$

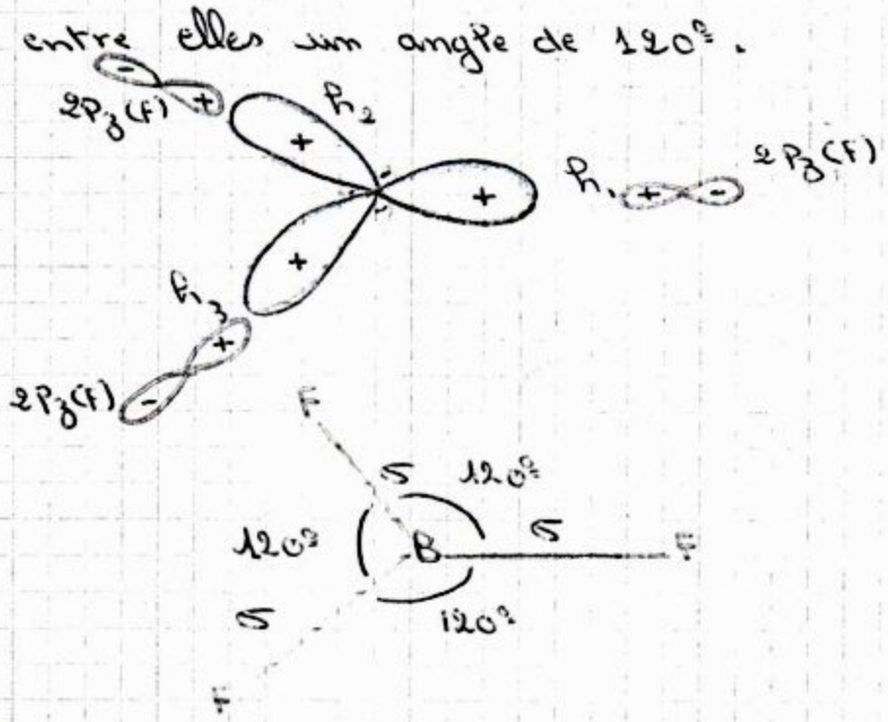
ETUSUP .com

- $b_2 = \dfrac{-a_1 a_2}{b_1}$.
- $b_2 = -\dfrac{(1/\sqrt{3})^2}{\sqrt{2/3}}$.
- $b_2 = -\dfrac{1}{\sqrt{3}} \times \dfrac{1}{\sqrt{2}}$.

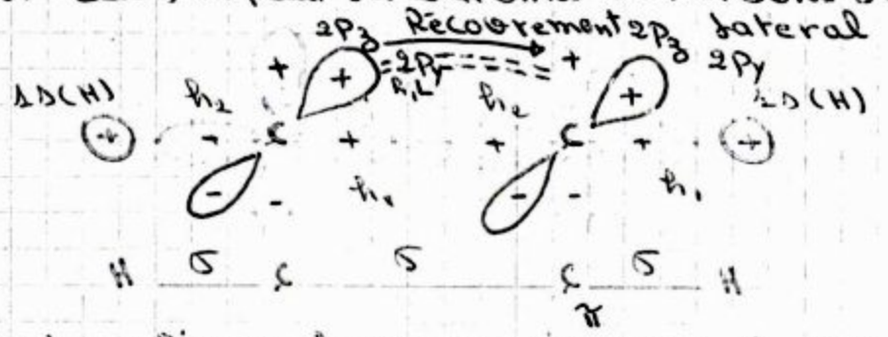
$$\boxed{b_2 = -\frac{1}{\sqrt{6}}}$$

$$\boxed{a_2^2 + b_2^2 + c_2^2 = 1} \Rightarrow \boxed{c_2 = \sqrt{1 - b_2^2 - a_2^2}}$$

5- B est hybride sp^2 : il présente 3 O.A.H : h_1 ; h_2 et h_3 qui font entre elles un angle de 120°.

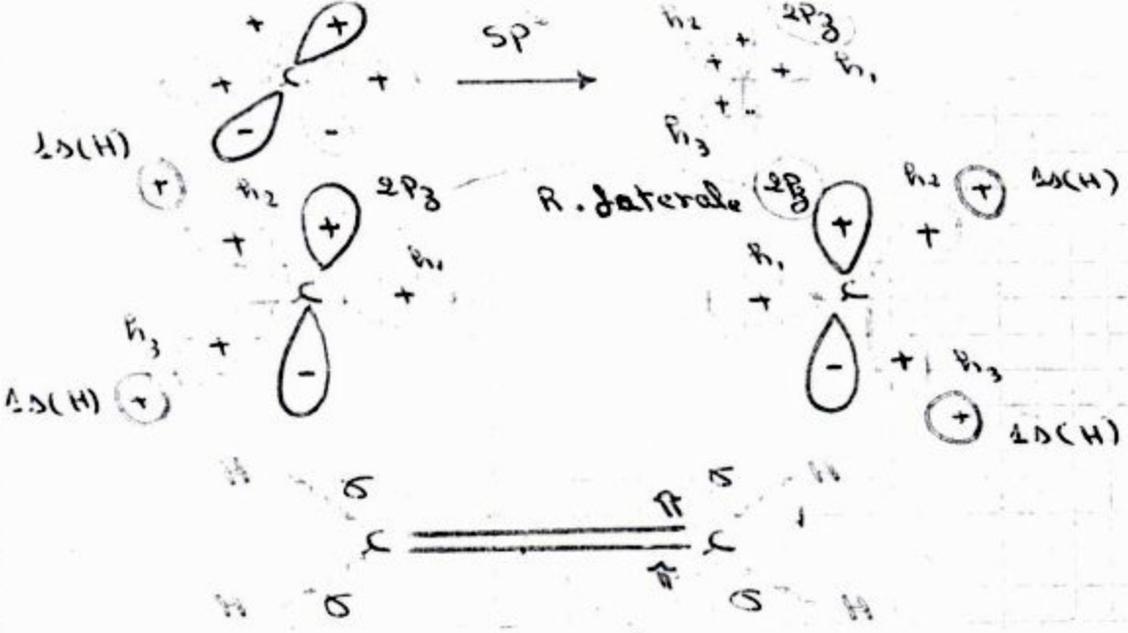


6- Il faut expliquer la géométrie de C_2H_2 par l'hybridation sp. Pour cela, il faut les 2 atomes de carbone soient hybridé sp.



7- Il faut expliquer la géométrie de C_2H_4 par l'hybridation sp^2. Pour cela, il faut les 2 atomes de carbone.

ETUSUP .com



$$\rho = \frac{f_i^2 + c_i^2 + d_i^2}{a_i^2}$$

ETUSUP .com

ETUSUP.com

Programmation
Cours
Informatique
Optique
Chimie
Algébre
Corrigés
Mathématiques
Travaux Pratiques
Electricité
Physique
Résumés
Analyse
Diapo
Exercices
Livres
Contrôles Continus
Langues
MTU
Mécanique
Thermodynamique
Multimedia
Divers
Economie
Travaux Dirigés
Droit
Chimie Organique

et encore plus..